Probabilità e meccanica statistica

La verità non si trova mediante prove, ma mediante esplorazione

Simone Weil

Angelo Vulpiani Dipartimento di Fisica, Università Sapienza, Roma

La teoria della probabiltà è ormai una branca ben sviluppata della matematica, molto rilevante sia nelle applicazioni pratiche che in ambito teorico (ad incominciare dalla meccanica statistica). Nonostante ciò è ancora un argomento non particolarmente popolare. Forse uno dei motivi di questa scarsa attenzione è la persistenza di diverse scuole (frequentista, soggettivistica, assiomatica etc) su come intendere la probabilità, cosa che a volte risulta un po' troppo accademica.

Dopo una rapida presentazione delle varie interpretazioni, in particolare dell'approccio di Kolmogorov, mi concentrerò sull'uso della probabilità per la descrizione dei sistemi deterministici caotici e i fondamenti della meccanica statistica. Verrà messo in evidenza il ruolo dei teoremi limite nella costruzione di una formulazione matematica dell'approccio di Boltzmann. Un'enfasi speciale sarà dedicata all'approccio di Khinchin per l'ergodicità ed all'idea di tipicità nei sistemi macroscopici con un numero molto grande di gradi di libertà.

Introduzione

Parlare in modo esauriente in poche pagine di probabilità è un'impresa praticamente impossibile. Mi limiterò a cercare di chiarire un mio punto di vista, credo condiviso da una fetta della comunità dei fisici teorici. Ovviamente la presentazione si basa ampiamente sulla mia esperienza di ricerca in meccanica statistica e sistemi caotici.

Cominciamo con una domanda ovvia: *perché vale la pena di occuparsi di probabilità?* Di motivi ce ne sono molti, eccone alcuni:

- il suo ruolo nella vita di tutti i giorni, ad esempio nel gioco del lotto, investimenti in borsa e interpretazione delle analisi mediche;
- la sua rilevanza nelle scienze e nella tecnologia;
- è ancora un argomento controverso ed esistono varie scuole che ne danno interpretazioni diverse.

La probabilità è una scienza giovane, la sua (prei)storia inizia solo nel 16-mo secolo nel frivolo mondo dei giochi (dadi, carte, scommesse); ha poi avuto un ruolo fondamentale nella meccanica statistica, nella meccanica quantistica, e più recentemente ha avuto intersezioni con il

caos deterministico e la complessità. Tuttavia, nonostante la sua grande rilevanza, la probabilità è ancora un argomento non molto popolare sia in ambito accademico che tra i media.
Inizio con una breve carrellata di opinioni diverse (anche provocatorie):
• *Tra la probabilità e la matematica c'è la stessa relazione che intercorre tra il mercato nero e l'economia* (diceria maligna del passato).
• *Le stime probabilistiche non sono falsificabili. E, naturalmente, non sono neppure verificabili ...* (K. Popper).
Popper riteneva inconsistente l' uso della probabilità in ambito deterministico, su questo tema c'è anche l'opinione esattamente opposta:
... non credo che lei abbia ragione quando sostiene la tesi che è impossibile derivare conclusioni statistiche da una teoria deterministica. Le basti pensare alla meccanica statistica (lettera di A. Einstein a K. Popper).
• *La vera logica di questo mondo è il calcolo delle probabilità... Questa branca della matematica che di solito viene ritenuta favorire il gioco d'azzardo, quello dei dadi e le scommesse, e quindi estremamente immorale, è la sola matematica per uomini pratici* (J.Clerk Maxwell).
• *La probabilità non esiste* (B. de Finetti).
Affermazione chiaramente provocatoria: de Finetti ha dedicato gran parte della sua vita allo studio della probabilità.
Concludo con le mie preferite:
• *Uno dei compiti più importanti della teoria delle probabilità è identificare quegli eventi la cui probabilità è vicina a zero o ad uno* (A.A. Markov).
• *La teoria della probabilità è la teoria della misura più un'anima.* [L' anima è la nozione di indipendenza] (M. Kac).
• *La probabilità, come il tempo, è un concetto inventato dagli esseri umani, e gli esseri umani devono assumersi la responsabilità delle oscurità che li circondano* (J.A. Wheeler).

Le principali interpretazioni della probabilità

Per la probabilità persiste una lunga tradizione su come debba essere intesa, un argomento forse un po' vetusto di interesse solo per qualche dotto accademico, vale comunque la pena una breve discussione delle più importanti interpretazioni (tra parentesi il principale sostenitore):
I- Probabilità classica (Laplace).
II- Probabilità come frequenza (von Mises).
III- Probabilità soggettiva (de Finetti), come grado di convinzione (Ramsey).
IV- Probabilità come teoria matematica (Kolmogorov).
Ogni interpretazione ha problemi e/o inconsistenze. Credo che l' aspetto veramente importante sia l' uso del calcolo della probabilità nella comprensione del mondo reale; temo che su questo difficilmente si avrà mai un'opinione completamente condivisa.

Probabilità classica

Si definisce la probabilità di un evento A come

$$Prob(A) = \frac{N(A)}{N_T}$$

ove $N(A)$ è il numero di casi favorevoli al verificarsi di A e N_T è numero di casi totali equiprobabili. Ad esempio per una moneta non truccata la probabilità di avere testa è $1/2$. Non è difficile convincersi che siamo in presenza di un circolo vizioso: la probabilità è definita in termini di equiprobabilità.
In alcuni casi (con eventi discreti) non ci sono problemi, ad esempio in tutti i giochi non truccati, usando le "simmetrie" e un po' di calcolo combinatorio è facile determinare la probabilità. Ma come regolarsi se il dado è truccato?
Ancora peggio se le variabili sono continue. È ben noto il "paradosso di Bertrand": dato un cerchio quanto vale la probabilità che una corda *tracciata a caso* sia più lunga del lato del triangolo equilatero inscritto? Non sembra esserci una risposta unica. In realtà non c'è alcun paradosso, siamo semplicemente davanti ad *una domanda mal posta*: si può tracciare *a caso* in modi diversi (in pratica assumendo una densità di probabilità uniforme per diverse variabili) ottenendo così diverse risposte.

Probabilità come frequenza

Si ha:

$$Prob(A) = \lim_{N \to \infty} f_N(A)$$

ove $f_N(A)$ è la frequenza dell'evento A in N tentativi.
In termini formali: per ogni ϵ si ha:

$$\lim_{N\to\infty} Prob(|f_N(A) - Prob(A)| > \epsilon) = 0\,.$$

Anche in questo caso si potrebbe obiettare che c' è un circolo vizioso: la probabilità è definita in termini di eventi con probabilità nulla.
Questa interpretazione della probabilità può essere introdotta solo per eventi ripetibili. A livello pratico è naturale chiedersi quanto grande deve essere N e come regolarsi con gli eventi a probabilità molto piccola.

Interpretazione soggettiva della probabilità

Si definisce la $Prob(A\, secondo\, il\, Signor\, Rossi)$ come la massima somma che il Signor Rossi è disposto a scommettere per ricevere 1 se l'evento A accade, accettando che altri possano scommettere contro di lui alle stesse condizioni.
Con questa definizione si ha un ovvio vantaggio: si può definire la probabilità di un qualsiasi evento, ad esempio *che domani la Terra sarà invasa da alieni*. Inutile dire che su questo delicato aspetto alcuni hanno da ridire, primo tra tutti Kolmogorov.
Ci sono ovviamente anche svantaggi, infatti la probabilità dipende dalla persona, così la probabilità di un evento può essere diversa per il Signor Rossi e la Signora Bianchi.
Questa interpretazione della probabilità non è molto popolare nell'ambito delle scienze naturali, mentre è quasi sempre accettata da chi lavora nelle scienze sociali. Anche in questi ambiti si pone il problema pratico di come determinare una probabilità; ad esempio per fissare il premio di un'assicurazione.

Probabilità come teoria matematica

Questo approccio è nato per rispondere alle esigenze di chiarezza (vedi il paradosso di Bertrand), è iniziato alla fine del 19-mo secolo (Borel, Cantelli, Lévy, Khinchin, von Mises, etc) e ha la sua codifica ufficiale nel libro di *Kolmogorov* del 1933 *Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitsrechnung* (Fondamenti della Teoria della Probabilità) [la traduzione inglese è consultabile su: http://www.kolmogorov.com/Foundations.html].
Alcuni aspetti concettuali da sottolineare:
* Non si definisce la probabilità di un evento, si danno solo delle proprietà matematiche che devono essere soddisfatte.
* Kolmogorov riteneva che l'interpretazione della probabilità in termini di frequenza fornisse la migliore connessione tra il formalismo matematico e la realtà fisica. Questa era una sua convinzione personale (condivisa da chi scrive), ma non è una conseguenza dell' approccio assiomatico.
* Non per ogni evento ha senso parlare di probabilità, Kolmogorov è esplicito: *l'assunzione che una definita probabilità esiste per un dato evento sotto certe condizioni è un'ipotesi che deve essere verificata e giustificata in ciascun caso individuale* su questo punto il dissenso con de Finetti è netto.

Gli assiomi di Kolmogorov

Vediamo ora gli assiomi introdotti da Kolmogorov e il loro significato. Consideriamo lo *spazio degli eventi* Ω, costituito dall' insieme degli *eventi elementari* ω e da $\mathcal{F}$ una famiglia di sottoinsiemi di Ω.
I- $\mathcal{F}$ è un'algebra d' insiemi, cioè $\Omega \in \mathcal{F}$ ed inoltre $\mathcal{F}$ è chiusa rispetto all' operazione di unione, intersezione e complemento.
II- Ad ogni elemento A di $\mathcal{F}$ si associa un numero reale non negativo $P(A)$, la probabilità di A, con $P(A) \geq 0$.
III- $P(\Omega) = 1$.
IV- Se due insiemi A e B sono disgiunti (cioè $A \cap B = \emptyset$) allora $P(A \cup B) = P(A) + P(B)$.
**Una variante delicata del IV* (additività numerabile): se $\{A_j\}$ è una collezione numerabile di insiemi a due a due disgiunti allora

$$P(\bigcup_{j=1}^{\infty} A_j) = \sum_{j=1}^{\infty} P(A_j)\ .$$

A prima vista può sembrare che il tutto sia piuttosto pedante, ma con un po' di riflessione non è troppo difficile capire le motivazioni dei vari assiomi:
I- L' algebra d'insiemi $\mathcal{F}$ specifica gli eventi per i quali si può parlare di probabilità; se esiste la

probabilità di A e B allora è lecito parlare di probabilità di $A \cup B$, di $A \cap B$, del complemento di A, etc.
III- Con certezza (probabilità $= 1$) succede qualcosa.
IV- Se non c'è sovrapposizione tra A e B (cioè se accade A non si verifica mai B) allora $Prob(evento\,A\,, oppure\,evento\,B) = Prob(evento\,A) + Prob(evento\,B)$.
Gli assiomi di Kolmogorov sono perfettamente compatibili con la definizione della probabilità classica; inoltre l'insieme degli assiomi non è contradditorio.

Probabilità e mondo reale

Invece di addentrarmi in discussioni senza fine sulle interpretazioni della probabilità, preferisco concentrarmi sull'uso del calcolo delle probabilità nella descrizione del mondo reale, in particolare in fisica. Due domande nascono spontanee:
a) La probabilità ha un carattere epistemico oppure ontico (i.e. *intrinseco*)?
b) La probabilità deve essere interpretata come una proprietà soggettiva oppure oggettiva?
In altri termini, il concetto di probabilità va inteso come uno strumento che usiamo per studiare i fenomeni naturali, o piuttosto la natura stessa ha un carattere intrinsecamente probabilistico?
In meccanica quantistica la probabilità è considerata come una proprietà intrinseca cioè ontica, in ambito classico la situazione è meno chiara.
Ovviamente un carattere ontico implica una proprietà oggettiva; tuttavia un'interpretazione epistemica non esclude proprietà oggettive.

Probabilità in un mondo deterministico: un ossimoro?

In fisica classica in genere si assume che valga il determinismo, cioè che esista una regola di evoluzione, non necessariamente esplicita, che dato lo stato di un sistema al tempo iniziale $\mathbf{x}(0)$, determina univocamente $\mathbf{x}(t)$ per $t > 0$; le leggi di Newton della meccanica sono di questo tipo.
La domanda *cosa succede nel futuro se conosco* $\mathbf{x}(0)$*?* a volte può essere senza senso anche in ambito deterministico; ad esempio questo accade se il sistema è "complicato" (oggi diremmo caotico). Lasciamo la parola a J. Clerk Maxwell:
Il fatto che dagli stessi antecedenti seguano le stesse conseguenze è una dottrina metafisica. ... Ma non è molto utile nel mondo in cui viviamo, ove non si verificano mai gli stessi antecedenti e nulla accade identico a se stesso due volte. ... L' assioma della fisica che ha, in un certo senso, la stessa natura è che da antecedenti simili seguono conseguenze simili.
La domanda "giusta" (dell'*uomo pratico*, come direbbe Maxwell) sembra essere: *cosa succede nel futuro se conosco* $\mathbf{x}(0)$ *con una data incertezza?* Questo è un problema di probabilità.

Caos deterministico

È ormai ben assodato che esistono sistemi deterministici che mostrano un' evoluzione temporale piuttosto irregolare, simile a quella che ci si aspetta nei processi stocastici e con una forte dipendenza dalla condizione iniziale, cioè piccole differenze al tempo iniziali vengono amplificate in modo esponenziale: questo è il famoso (famigerato?) *effetto farfalla*.
La possibilità di questo tipo di comportamento venne compresa per la prima volta da H. Poincarè:
Se pure accadesse che le leggi della natura non avessero più alcun segreto per noi, anche in questo caso potremmo conoscere la situazione iniziale solo approssimativamente .... può accadere che piccole differenze nelle condizioni iniziali ne producano di grandissime nei fenomeni finali. Un piccolo errore nelle prime produce un errore enorme nei secondi. La previsione diventa impossibile e si ha un fenomeno fortuito.
Il comportamento caotico non è un fatto eccezionale: lo si incontra un po' ovunque (ecologia, astronomia, geofisica, ottica, etc) e può essere presente anche in sistemi apparentemente innocenti; questo è ormai ben chiaro dai lavori di E. Lorenz, M. Hénon e B.V. Chirikov, per citare solo i principali protagonisti della rinascita del caos.
Un esempio di comportamento caotico facile da studiare numericamente è fornito dalla mappa logistica

$$x(n+1) = 4x(n)(1 - x(n)) \;, \qquad (1)$$

con $x(n) \in [0, 1]$, che costituisce un modello (iper)semplificato, ma non banale, per la dinamica delle popolazioni. L' andamento tempora-

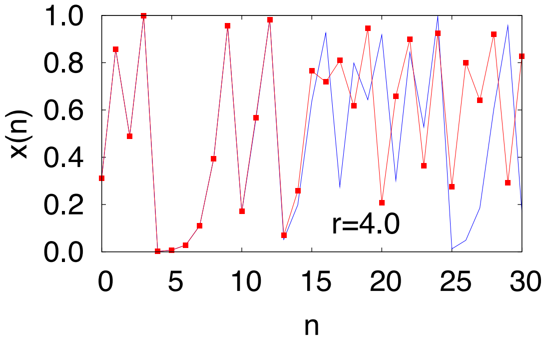

Figura 1: *Evoluzione nel tempo di due traiettorie della mappa logistica $x(n+1) = rx(n)(1-x(n))$, per $r = 4$ e con condizioni iniziali molto vicine ($|x(0) - x'(0)| = 4 \times 10^{-6}$). Notare che il comportamento è irregolare, e come solo dopo 16 iterazioni le due traiettorie diventano completamente diverse.*

le $\{x(0), x(1), x(2), ..., x(T)\}$ appare "erratico", inoltre un piccolo errore raddoppia ad ogni passo, $\delta x(n) \sim 2\delta x(n-1)$, pertanto dopo pochi passi l'errore è enorme anche se $\delta x(0)$ è molto piccolo, vedi Figura 1.

Consideriamo un sistema deterministico con un'incertezza sulla condizione iniziale. Questo corrisponde ad avere una densità di probabilità $p_0(\mathbf{x})$, diversa da una delta, ad esempio se la condizione iniziale $\mathbf{x}(0)$ è nota con precisione ϵ allora $p_0(\mathbf{x})$ è diversa da zero nella regione $|\mathbf{x} - \mathbf{x}(0)| < \epsilon$. Non è difficile trovare un'equazione che permette di determinare la densità di probabilità $p_t(\mathbf{x})$ al tempo t, proprio come nei processi stocastici.

Ad esempio nelle mappe unidimensionali $x(t+1) = f(x(t))$ si ha la regola:

$$p_{t+1}(x) = \sum_k \frac{p_t(y_k)}{|f'(y_k)|}$$

ove le y_k sono quei punti (preimmagini) tali che $f(y_k) = x$.

Possiamo domandarci se, dopo un tempo sufficientemente lungo, indipendentemente dalla densità iniziale $p_0(\mathbf{x})$, la $p_t(\mathbf{x})$ tende a una densità $p_\infty(\mathbf{x})$. Se questo avviene il sistema è detto mescolante (mixing) e possiamo dire che la densità $p_\infty(\mathbf{x})$ è una proprietà intrinseca del sistema, cioè ha un carattere oggettivo. Il risultato è indipendente dalla grandezza dell' incertezza iniziale e si ha sempre la stessa densità di probabilità asintotica. Questo accade per la mappa logistica:

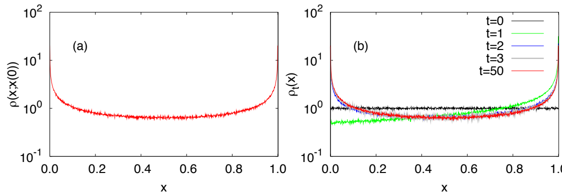

Figura 2: *A sinistra la densità di probabilità ottenuta con un istogramma, per la mappa logistica con $T = 10^7$ per un generico $x(0)$ con un $\Delta x = 10^{-3}$. A destra l'evoluzione di $p_t(x)$ a $t = 1, 2, 3$ e 50 ottenuto con 10^6 traiettorie a partire da $x(0)$ uniformemente distribuite in $(0, 1]$, notare come già per $t = 3$ la $p_t(x)$ è praticamente uguale alla $p_\infty(x)$.*

si ha

$$\lim_{t\to\infty} p_t(x) = p_\infty(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{x(1-x)}} \ .$$

Un altro modo di introdurre la probabilità in ambito deterministico è il seguente (sempre per semplicità di notazione consideriamo il caso di una sola variabile e di tempo discreto): data la condizione iniziale $x(0)$ possiamo generare una traiettoria $\{x(1), x(2), ..., x(T)\}$ e da questa calcolarci una densità di probabilità in modo empirico:

$$p(x, x(0)) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} \delta(x - x(t)).$$

Ovviamente il risultato potrebbe dipendere da $x(0)$; se questo non accade si dice che il sistema è ergodico.

Per capire gli aspetti essenziali del comportamento caotico in ambito deterministico consideriamo due sistemi con comportamento diverso: la rotazione sul cerchio

$$x(t+1) = x(t) + \omega \ \ , \ mod\, 1 \qquad (2)$$

e la mappa logistica (1).

Nel caso della mappa (2) è facile mostrare che se ω è irrazionale allora la $p(x, x(0))$ non dipende da $x(0)$ ed è uniforme nell'intervallo $(0, 1]$, tuttavia il sistema benché ergodico, non è mescolante, cioè non esiste il limite di $p_t(x)$ per $t \to \infty$. Per la mappa logistica (1) non è possibile un trattamento analitico; comunque ci sono chiare evidenze numeriche del comportamento ergodico e mescolante, vedi Figura 2.

Tornando al problema sulla connessione tra probabilità e sistemi deterministici, mi sembra onesto concludere che nella diatriba tra Einstein e Popper il netto vincitore (sulla linea Maxwell e Boltzmann) è Einstein: anche in un contesto puramente deterministico ha perfettamente senso parlare di probabilità (che non ha un carattere soggettivo).

Il Problema di fondo della Meccanica Statistica: la grande visione di Boltzmann

A livello microscopico un corpo materiale è costituito da un grande numero di atomi, $O(10^{20} - 10^{25})$, che evolvono seguendo le leggi di Newton (assumiamo, solo per semplicità, la validità della fisica classica). Al contrario a livello macroscopico le proprietà termodinamiche sono descritte da poche variabili: temperatura, pressione etc. Se non si vuole rimanere ad un livello meramente pragmatico è necessario porsi la seguente domanda: quale connessione esiste tra la descrizione a livello meccanico e la termodinamica?
Il contributo più significativo a questo enorme problema è sicuramente quello di Boltzmann. La sua idea visionaria può essere riassunta in due punti:
I) *Introduzione di idee probabilistiche e loro interpretazione in termini fisici.*
II) *Una relazione che fornisca un legame tra quantità nel mondo macroscopico (termodinamica) e quelle nel mondo microscopico (dinamica).*
Il punto I) è estremamente delicato ed ancora oggi oggetto di studio. L'idea è la seguente: abbiamo un sistema composto da N particelle, il cui stato fisico è dato dal vettore $\mathbf{X}$ le cui componenti sono le posizioni e le velocità di tutte le particelle. Quando uno strumento effettua una misura (ad esempio della pressione) di fatto compie una media temporale di una funzione di $\mathbf{X}$:

$$\frac{1}{\mathcal{T}} \int_0^{\mathcal{T}} A(\mathbf{X}(t))\, dt \ ,$$

ove $\mathcal{T}$ è il tempo di misura; in pratica, poiché i tempi tipici della dinamica microscopica sono $O(10^{-9} - 10^{-10} s)$, possiamo assumere $\mathcal{T} = \infty$.
Ovviamente per poter prevedere teoricamente il risultato della misurazione bisognerebbe:
a) conoscere la condizione iniziale $\mathbf{X}(0)$;
b) essere in grado di trovare l' evoluzione $\mathbf{X}(t)$ e
c) calcolare l'integrale.
Tutte cose che sono chiaramente fuori dalla portata umana.
L' idea di Boltzmann fu di sostituire la media temporale con una media da calcolare con un'opportuna densità di probabilità.
È possibile tutto ciò? Non è affatto ovvio, questa congettura è chiamata *ipotesi ergodica*. Non è difficile convincersi che, nel caso l'ipotesi sia soddisfatta la probabilità di una regione $\mathcal{A}$ dello spazio delle fasi non è altro che la frazione di tempo che il sistema durante la sua evoluzione (su un tempo molto lungo) passa in $\mathcal{A}$.
Torniamo al punto II): la relazione che fornisce il ponte tra la termodinamica ed il mondo microscopico è incisa sulla tomba di Boltzmann:

$$S = k \ln W \ , \tag{3}$$

ove S è l'entropia del corpo macroscopico, con N particelle contenute in un volume V e con energia E, e W è il numero di stati microscopici che hanno lo stesso stato macroscopico. Dato un sistema descritto da un'Hamiltoniana $H(\mathbf{X})$

$$W(N, V, E) = \int \delta\Big(H(\mathbf{X}) - E\Big)\, d\mathbf{X} \,,$$

notare la S è una quantità termodinamica mentre la W è determinata dalle proprietà microscopiche; abbiamo quindi che la (3) è la legge ponte tra il mondo della meccanica e quello della termodinamica.
Su come intendere la probailità in meccanica statistica, ovviamente, ci sono diverse scuole, limitiamoci alle due più importanti: quella di Jaynes (massima entropia) e quella (diciamo tradizionale) di Boltzmann.
Secondo il punto di vista soggettivista di Jaynes, che non esito a catalogare come un "estremista antiboltzmanniano", la meccanica statistica non sarebbe parte della fisica, bensì una teoria di inferenza statistica: il principio di massima entropia è la regola per determinare le probabilità in circostanze in cui si hanno solamente informazioni parziali, ad esempio sono noti alcuni valori medi.
In questo approccio la probabilità è interpretata come misura del grado di convinzione di una proposizione, e non una quantità fisicamente misurabile.

Non è questa la sede per una discussione sul principio di massima entropia, il cui successo in meccanica statistica di equilibrio, a mio avviso, è dovuto solo ad una serie di fortunate coincidenze, mi limito a ripetere un'osservazioni più volte sollevata: *come è possibile fare inferenza dalla propria ignoranza?*
Al contrario nell'approccio di Boltzmann si ricorre all' ergodicità, che nasce, in modo naturale, dalla dinamica e dalla necessità di collegarsi con l' esperienza e permette di introdurre la probabilità in un contesto deterministico.

Perché, a volte, è possibile usare la probabilità nel mondo reale?

Dopo i risultati numerici iniziati con il pionieristico lavoro di Fermi, Pasta e Ulam ed il teorema di Kolmogorov, Arnold e Moser, è ben chiaro che un generico sistema Hamiltoniano, da un punto di vista matematico, non è ergordico. Tuttavia abbiamo un'impressionante evidenza del fatto che, in sistemi macroscopici, l'ipotesi ergodica funziona più che bene. Basti pensare al metodo della dinamica molecolare in cui si integrano numericamente le equazioni di Hamilton e si calcolano, sempre numericamente, medie temporali. Il fatto che questi risultati siano in perfetto accordo con i calcoli probabilistici (ottenuti con tecniche perturbative e/o numeriche) e anche esperimenti di laboratorio, mostra che, anche se da un punto di vista strettamente matematico i sistemi macroscopici non sono ergodici, lo sono "di fatto" in un senso che sarà discusso in seguito.
Un aspetto tecnicamente rilevante, spesso non considerato con la giusta attenzione dai filosofi della scienza, è che nella teoria delle probabilità si calcolano medie, distribuzioni etc, mentre nella realtà spesso c'è un unico sistema. Un corpo macroscopico è costituito da un numero di particelle che è virtualmente infinito, vedremo in seguito che è proprio questo che permette di usare il calcolo della probabilità, in particolare i teoremi limite, per capire il comportamento di un singolo oggetto macroscopico.

L'idea di tipicità

Quello che, più o meno, hanno in testa i fisici (o almeno una parte) quando pensano ai fondamenti della meccanica statistica è che, a parte casi veramente "strani" (quelli non tipici), il singolo sistema, se è grande, si comporta come la media. In pratica si può prevedere l'andamento temporale della temperatura di una singola pentola dal comportamento medio di un insieme di tante pentole nelle stesse condizioni. Questa è quella che viene chiamata tipicità: in un sistema con N componenti ed un osservabile A che dipende da tutte le componenti, ci si aspetta che per ogni ϵ

$$\lim_{N\to\infty} Prob(|A - \langle A\rangle| > \epsilon) = 0\,.$$

È possibile, a volte, formalizzare l'idea di tipicità. In termini molto stringati: se $N \gg 1$ i teoremi limite ci assicurano che A *osservato* in una singola misura è molto vicino a $\langle A\rangle$, a parte eventi non tipici che hanno probabilità molto piccola (che diventa zero per $N \to \infty$).
Richiamiamo l' aspetto forse più importante del calcolo della probabilità:
Tutto il valore epistemologico della teoria delle probabilità è basato su questo: i fenomeni aleatori, considerati nella loro azione collettiva a grande scala, generano una regolarità non aleatoria. (B.V. Gnedenko e A.N. Kolmogorov)
Il caso più semplice (e più rilevante) di regolarità statistica è senza dubbio la legge dei grandi numeri:
Sotto opportune ipotesi (ad esempio varianza finita), la media "empirica" di N variabili casuali indipendenti $\{x_n\}$, distribuite con la stessa densità di probabilità $p(x)$, nel limite di N grande è "vicina" alla media:

$$y_N = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} x_n\, {}'' \to '' \, \langle x\rangle$$

La legge dei grandi numeri vale anche per variabili correlate (ma non troppo).

Il punto di vista di Khinchin sull'ergodicità

Khinchin ha avuto il grande merito di andare oltre l'aspetto strettamente matematico dell'ergodicità, utilizzando la legge dei grandi numeri ha fatto un passo significativo per formalizzare l'idea di tipicità. Ha notato come l'ergodicità intesa in senso strettamente matematico, per

la meccanica statistica non è necessaria, infatti (usando una barra per denotare la media temporale):
a) nei sistemi termodinamici il numero di costituenti microscopici è molto grande;
b) la questione interessante per la meccanica statistica non è la validità della relazione

$$\bar{A} = \langle A \rangle$$

ove $\langle A \rangle$ è calcolata con la distribuzione di probabilità microcanonica, per osservabili generiche, bensì per le poche grandezze rilevanti nella termodinamica, come ad esempio l'energia cinetica, la pressione e la densità.
c) è accettabile che la media temporale $\bar{A}(\mathbf{X})$ a partire da $\mathbf{X}$ non coincida con $\langle A \rangle$ per condizioni iniziali $\mathbf{X}$ contenute in regioni di misura complessivamente piccola (tendente a zero se $N \to \infty$)
d) è accettabile un'ergodicità non perfetta, cioè

$$|\bar{A}(\mathbf{X}) - \langle A \rangle| < \epsilon$$

con $\epsilon \to 0$ se $N \to \infty$.
Khinchin, con un uso magistrale della legge dei grandi numeri, ha mostrato che in un sistema Hamiltoniano con interazioni a corto raggio (e.g. potenziali di Lennard-Jones nel continuo e/o interazioni a primi vicini nel discreto, purchè lontano dai punti critici), per la classe di funzioni della forma

$$f(\mathbf{X}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} g(\mathbf{x}^{(n)}),$$

ove $\mathbf{x}^{(n)}$ è il vettore che contiene le coordinate e gli impulsi dell'n-ma particella e $g(\mathbf{x}) = O(1)$, si ha

$$Prob\Big(|\bar{f} - \langle f \rangle| < c_1 N^{-1/4}\Big) < c_2 N^{-1/4},$$

ove c_1 e c_2 sono $O(1)$ e la probabilità è calcolata con la misura microcanonica.
Abbiamo quindi che per $N \gg 1$ su quasi tutta la superficie ad energia costante, cioè a parte una regione di misura $O(N^{-1/4})$, si ha $\bar{A} = \langle A \rangle + O(N^{-1/4})$. Possiamo dire che, anche se da un punto di vista matematico l'ergodicità non vale, siamo autorizzati ad assumerla nello studio di una certa classe fisicamente rilevante di osservabili in corpi macroscopici.

Il metodo Monte Carlo

I Metodi Monte Carlo sono un'ampia classe di metodi computazionali basati sul campionamento casuale per ottenere risultati numerici inerentemente sistemi fisici (e non solo). Le loro origini risalgono alla metà degli anni quaranta ed i loro formalizzatori salienti sono stati Fermi, von Neumann e Ulam (il nome Monte Carlo fu attribuito a queste tecniche in seguito da Metropolis, proprio in riferimento al noto casinò di Monte Carlo, al fine di esaltarne le caratteristiche squisitamente probabilistiche). In estrema sintesi, e semplificando oltremodo, dato un esperimento, possiamo effettuare una serie di misure inerentemente una data osservabile: come conseguenza di queste misure ricaviamo una sequenza di numeri casuali ed è lecito chiederci come questi numeri siano distribuiti: lo spazio degli eventi associato alla variabile fisica -che è all'atto pratico una variabile aleatoria definita su tale spazio- ha una sua distribuzione di probabilità che possiamo riprodurre numericamente, mediante il metodo Monte Carlo. I processi fisici che possiamo modellizare mediante tale approccio sono molteplici, dai decadimenti radioattivi ai tempi di arrivo di raggi cosmici, dal discernere in quale fase viva un materiale ferromagnetico alla simulazione delle proprietà conduttrici degli stati condensati, etc.

Chiudiamo questa breve parentesi sul contributo di Khinchin con un' osservazione sulle simulazioni numeriche. Notiamo che, sia nella dinamica molecolare che nel Monte Carlo, si assume l'ergodicità (per il Monte Carlo questa assunzione è matematicamente provata) e si calcolano medie temporali. Ma la traiettoria non può essere tanto lunga da visitare tutto lo spazio delle fasi (il tempo necessario cresce esponenzialmente con il numero di particelle). Nonostante questo c'è un'impressionante evidenza della validità pratica dei due metodi, ed è naturale domandarsi quale sia il segreto di questa efficacia. Alla luce dei risultati di Khinchin viene da pensare che il

La Dinamica Molecolare

Le prime simulazioni di dinamica molecolare risalgono agli anni 50 e 60 ad opera di Alder, Rahman e Verlet (per quanto concerne sistemi molto grandi come proteine e polimeri, invece, si dovette attendere la seconda metà degli anni ottanta, a dire l'avvento di macchine calcolatrici considerevolmente più efficienti e performanti rispetto a quelle a disposizione agli Scienziati negli anni Sessanta). Si identifica in generale con il termine Dinamica Molecolare quell'insieme di tecniche computazionali di simulazione che, mediante la risoluzione delle equazioni del moto, permette di studiare l'evoluzione temporale di un sistema fisico a livello atomico e molecolare: l'attuazione pratica consta *semplicemente* nell'integrazione numerica delle equazioni del moto di tutti i gradi di libertà microscopici coinvolti. Mediando sull'opportuna scala di tempo le osservabili consone si possono ottenere le proprietà termodinamiche del sistema in esame (e.g. la velocità quadratica media delle particelle è linearmente legata alla temperatura in cui vive il sistema che queste compongono).

punto di forza della dinamica molecolare e del Monte Carlo è nel fatto che vengono calcolate medie temporali di quantità non troppo strane, diciamo moralmente (per tutti gli scopi pratici) del tipo di quelle individuate da Khinchin.

Oltre la media

Come passo successivo alla legge dei grandi numeri è naturale chiedersi quanto sono rilevanti le fluttuazioni di y_N intorno al valor medio. La risposta è data dal teorema del limite centrale (TLC). Sotto le ipotesi di varianza finita e di debole correlazione delle $\{x_n\}$ si ha

$$P(y_N) \simeq \sqrt{\frac{N}{2\pi\sigma^2}} e^{-N\frac{(y_N-\langle x\rangle)^2}{2\sigma^2}} . \qquad (4)$$

Notiamo che il TLC descrive le fluttuazioni non troppo grandi di y_N. Per valori molto lontani dalla media, diciamo $|y_n - \langle x\rangle| \gg \sigma/\sqrt{N}$, si deve ricorrere alla teoria delle grandi deviazioni: la (4) è rimpiazzata da

$$P(y_N) \sim e^{-NC(y_N)} .$$

La $C(y)$ è chiamata funzione di Cramér e dipende esplicitamente dalla $p(x)$ e ha le seguenti proprietà:
a) $C(y) > 0$ per $y \neq \langle y\rangle = \langle x\rangle$ e $C(\langle y\rangle) = 0$;
b) $C(y) \simeq (y - \langle y\rangle)^2/2\sigma^2$ per y vicino a $\langle y\rangle$;
c) $d^2C(y)/dy^2 > 0$.
Notiamo che nel TLC appaiono solo la media e la varianza della $p(x)$, inoltre la funzione di Cramér è approssimata da una parabola intorno a $\langle y\rangle$, mentre per valori di y più lontani è rilevante la forma esplicita della $p(x)$.

Un cenno al non equilibrio

Consideriamo ora brevemente il problema dell'irreversibilità. Boltzmann capì che nella conciliazione tra meccanica e termodinamica un ruolo importante è giocato dalle condizioni iniziali (cioè posizioni e velocità delle particelle del gas): quelle che portano ad un comportamento irreversibile sono molto più numerose di quelle dalle quali si ha un comportamento reversibile:
Il secondo principio è una sorta di risultato probabilistico, che per i corpi macroscopici (a causa dell'enorme numero di particelle che contengono) è praticamente certo.
Piccola nota tecnica su sviluppi recenti: ora possiamo studiare sistemi piccoli ($N \sim 10^2$) e misurare la probabilità della violazione del secondo principio (relazione di Gallavotti-Cohen).
Anche se spesso si ricorre ad una spiegazione probabilistica, ad esempio nel teorema H, rimane il fatto che quando parliamo del secondo principio della termodinamica intendiamo che una pentola di acqua calda lasciata a sé stessa si raffredda; si tratta di una singolo pentola (quella nella nostra cucina) e non di un ensemble di tante pentole. Su questo punto c'è una certa confusione, in particolare sul ruolo del caos deterministico, che spesso viene associato all' irreversibilità (scuola di Prigogine).
Consideriamo un sistema con una densità di probabilità iniziale $\rho(\mathbf{X}, 0)$. Possiamo calcolare, in linea di principio, $\rho(\mathbf{X}, t)$ per $t > 0$, e domandarci cosa succede nel limite $t \to \infty$. Sotto certe

condizioni (cioè se il sistema è mescolante, una proprietà più forte dell'ergodicità) per $t \to \infty$ la densità di probabilità tende ad una densità invariante

$$\rho(\mathbf{x}, t) \to \rho_{inv}(\mathbf{x}) \ . \tag{5}$$

Questa è una proprietà importante ed interessante, nell'ambito dei sistemi dinamici, ma non ha niente a che vedere con l'irreversibilità della fisica: la (5) infatti descrive l'evoluzione di un ensemble di condizioni iniziali e non il comportamento del singolo sistema. Per capire questo punto basta considerare una mappa caotica e mescolante, ad esempio il famoso *gatto di Arnold*:

$$x_{t+1} = x_t + y_t \quad mod\ 1\ , \ \ y_{t+1} = y_t + x_{t+1} \quad mod\ 1\ ,$$

ed osservare una singola realizzazione seguendo l'evoluzione diretta

$$\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, ..., \mathbf{x}_{t-1}, \mathbf{x}_t \tag{6}$$

e quella inversa (cioè proietatta al contrario)

$$\mathbf{x}_t, \mathbf{x}_{t-1}, ..., \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_0 \ . \tag{7}$$

Nonostante il gatto di Arnold sia caotico e le successioni (6) e (7) appaiono irregolari, non si noterà, a differenza di quanto accade nei sistemi macroscopici, niente di strano nell' evoluzione inversa.

Un tentativo di conclusione

• Ha perfettamente senso parlare di probabilità anche in sistemi deterministici. In questo caso la probabilità è di tipo epistemico, non ha un carattere soggettivo. Questo accade se ci sono tanti gradi di libertà (meccanica statistica), e anche in quelli a bassa dimensione se c'è caos.
• In sistemi intrinsecamente stocastici si possono avere comportamenti certi (determinismo statistico) se sono coinvolte tante variabili (teoremi limite).
• L'ipotesi ergodica è tecnicamente equivalente ad un' interpretazione frequentistica. Tuttavia *nasce in modo naturale* in quanto connessa alla dinamica del sistema.
• In meccanica statistica la probabilità è usata per calcolare valori medi e capire che, per $N \gg 1$, la *singola* misura è vicina al valore medio. In questo caso l' interpretazione della probabilità non è affatto un aspetto fondamentale, basta avere un'idea del significato di eventi con probabilità molto piccola.
• Possiamo affermare con una certa sicurezza che in meccanica statistica le stime probabilistiche sono perfettamente falsificabili e concludere che l' opinione di Popper *Le stime probabilistiche non sono falsificabili. E, naturalmente non sono neppure verificabili* è errata. Ad esempio la distribuzione di Maxwell- Boltzmann prevede che la probabilità che il modulo della velocità v di una particella sia compreso tra v_1 e v_1 è:

$$Prob(v_1 < v < v_2) = B \int_{v_1}^{v_2} 4\pi v^2 e^{-v^2/\alpha}\, dv$$

$B = (m/2\pi k_B T)^{3/2}\,, \alpha = 2\pi k_B T/m$. Si può fare una misura sperimentale e confrontare il risultato delle osservazioni con la teoria: l'esperimento (tecnicamente difficile, effettuato molto tempo dopo la previsione teorica) è in perfetto accordo con il risultato teorico. Notare che (da un punto di vista logico) la previsione teorica poteva essere falsificata.

Ringrazio Marco Baldovin per i preziosi suggerimenti e un'attenta lettura di una prima stesura.

[1] G. Boffetta e A. Vulpiani: "Probabilità in Fisica: un'introduzione", *Springer Italia* (2012) .

[2] P. Castiglione, M. Falcioni, A. Lesne and A. Vulpiani: "Chaos and coarse graining in statistical mechanics", *Cambridde University Press* (1998) .

[3] M. Cencini, F. Cecconi e A.Vulpiani: "Chaos: From Simple Models to Complex Systems", *World Scientific* **Singapore** (2009) .

[4] C. Cercignani: "Ludwig Boltzmann: the man who trusted atoms", *Oxford University Press* (2006) .

[5] L. Cerino, F. Cecconi, M. Cencini e A Vulpiani: "The role of the number of degrees of freedom and chaos in macroscopic irreversibility", *Physica A* **442** (486) 2016.

[6] S. Chibbaro, L. Rondoni e A. Vulpiani: "Reductionism, Emergence and Levels of Reality", *Springer- Verlag* (2014) .

[7] D. Costantini: "I fondamenti storico- filosofici delle discipline statistico- probabilistiche", *Bollati Boringhieri* (2004) .

[8] B. de Finetti: "L'invenzione della verità", *Raffaele Cortina Editore* (2006) .

[9] P. Ehrenfest and T. Ehrenfest: "The conceptual foundation of the statistical approach in mechanics", **Dover** (1956) .

[10] D. Gillies: "Philosophical Theories of Probability", *Routledge* (2000) .

[11] S. Goldstein: "Typicality and notions of probability in physics", *in Y. Ben- Menahem, M. Hemmo (Eds.)* **Probability in physics** (Springer-Verlag) 2012.

[12] S. Goldstein: "Boltzmann's approach to statistical mechanics", *in J. Bricmont et al. (Eds.)* **Chance in physics** (Springer-Verlag) 2001.

[13] M. Falcioni e A. Vulpiani: "Ludwig Boltzmann: un tributo per i suoi 170 anni", *Lettera Matematica* **91** (16) 2014.

[14] M. Falcioni e A.Vulpiani: "Meccanica statistica elementare: i fondamenti", *Springer Italia* (2014) .

[15] G. Gallavotti e E.G.D. Cohen: "Dynamical ensembles in nonequilibrium statistical mechanics", *Physical Review Letters* **74** (14) 2694.1995

[16] H. Hosni: "Probabilità: come smettere di preoccuparsi e imparare ad amare l'incertezza", *Carocci* **Editore** (2018) .

[17] M. Kac: "Probability and related topics in physical sciences", *American Mathematical Soc.* **1** (1957) .

[18] A.I. Khinchin: "Mathematical Foundations of Information Theory", *Dover* (1957) .

[19] R. Klages, W. Just and C. Jarzynski (Eds.): "Non equilibrium statistical mechanics of small systems", *Wiley-VCH* (2013) .

[20] A.N. Kolmogorov: "Foundations of the theory of probability", *Chelsea Publishing Company* (1956) .

[21] J. L. Lebowitz: "Boltzmann's entropy and time's arrow", *Physics Today* **46** (32) 1993.

[22] H. Poincaré: "Geometria e caso", *Bollati Boringhieri* (1995) .

[23] K. Pomian (Ed.): "Sul determinismo", *Il Saggiatore* (1991) .

[24] D. Ruelle: "Caso e caos", *Bollati Boringhieri* (1992) .

[25] N. Zanghì: "I fondamenti concettuali dell' approccio statistico in fisica", *La Natura delle Cose* **Ed. V. Allori, M. Dorato, F. Laudisa e N. Zanghì** (Carocci Editore) 2005.

Vulpiani Angelo: è professore ordinario di Fisica Teorica presso il Dipartimento di Fisica di Sapienza Università di Roma dove svolge la sua attività sul caos nei sistemi dinamici, la meccanica statistica di non equilibrio, la turbolenza, i fenomeni di trasporto e reazione-diffusione.
In precedenza è stato professore associato presso l'Università dell'Aquila e Borsista CNR. È stato visiting professor presso diversi istituti di ricerca e Università in Francia, Belgio, Svezia, Danimarca e Stati Uniti.
Oltre a articoli su riviste specialistiche e testi avanzati in inglese ha pubblicato alcuni libri non specialistici: *Determinismo e Caos* (Nuova Italia Scientifica, 1994, Carocci 2004) e *Caso, Probabilità e Complessità* (Ediesse, 2014, Corriere della Sera 2018).
Per ulteriori dettagli sulla sua attività si veda http://tnt.phys.uniroma1.it/twiki/bin/view/TNTgroup/AngeloVulpiani